

В результате указанных процессов создается характерная для коньячных спиртов основа, обладающая богатым букетом и полным вкусом с тонами выдержки.

1. Одарченко В.Я. и др. Качество коньяка при выдержке.//Виноделие и виноградарство.- 2001. №2 с.16-17
2. Скурихин И.М. Химия коньячного производства. - М.: изд-во «Пищевая промышленность», 1969.

СИНТЕЗ И ПРЕВРАЩЕНИЯ ГИДРОПЕРОКСИДОВ МЕТИЛЦИКЛОГЕКСИЛБЕНЗОЛА

Батукова А.А., Курганова Е.А., Кратирова Д.Д.

Ярославский государственный технический университет

При алкилировании толуола циклогексанолом образуется смесь метилциклогексилбензола, которая содержит ~ 70 % *пара*- и 30 % *мета*-изомера. При автоокислении такой смеси кислородом воздуха в интервале температур 120 – 140 °С образуется смесь, содержащая до 13–15 % гидропероксидов.

Изучено взаимодействие сернокислого железа и едкого натра с гидропероксидами метилциклогексилбензола, выделены продукты: *n*-амил-*n*-толилкетон, 1-(*n*-толил)-1-циклогексанол, 1-(*n*-толил)-1-циклогексен, 5-гидроксипентил-*n*-толилкетон.

Гидропероксиды метилциклогексилбензолов разлагаются концентрированной серной кислотой с образованием *пара*-, *орто*-крезолов и циклогексанона.

Гидропероксиды *n*-метилциклогексилбензола при 140 °С разлагаются с расщеплением циклогексильного кольца до *n*-амил-*n*-толилкетона.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ФОРМЫ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Рукавишников В.В., Белик А.В.

Челябинский государственный университет

Современное моделирование в теоретической органической химии в настоящее время перспективно, востребовано и приобрело распространенный характер. Это касается не только условий реакций, физико-химических свойств органических соединений, но и оценки их пространственного строения.

До настоящего времени молекула в пространстве представлялась, как правило, в виде совокупности атомных образований со сферической симметрией. Конкретный образ молекулы определялся межатомными расстояниями и выбранной системой оценки атомных радиусов. В част-

ности, определенный интерес представляли модели с изменяемой системой атомных радиусов в зависимости от атомного окружения в молекуле, как это было сделано в модели DENSON [1]. Дальнейшее развитие этого подхода привело к модели ANSAB [2], где атомная сфера деформировалась в направлении атом-атомных взаимодействий. В результате соединение приобрело новую молекулярную форму. Подготовленная на языке СИ++ вычислительная программа позволяет получить наглядные представления о новом образе рассматриваемой молекулы. Как и ранее, критерием достоверности оценки молекулярной формы соединения через его объем служило удовлетворительное согласие расчетной и экспериментальной плотности соответствующего вещества. В настоящей работе рассмотрена применимость данного алгоритма к спиросочлененным циклическим углеводородам. В таблице приведены некоторые наиболее типичные результаты расчетов. Анализ данных показывает возможность применения новой модели для оценки соответствующих характеристик соединений данного класса.

№	Соединение	d_{4}^{20} (эксп.)	d_{4}^{20} (расч.)
1	Спиро [2.2] пентан	0.7572	0,7596
2	Циклопропилспиропентан	0.8395	0,7629
3	1-метилспиро [2.4]гептадиен-4.6	0.8646	0,7881
4	1,2-диметил-спиро[2,4]-гептадиен-4,6	0.8662	0,7845
5	N-карбозтокиспиро [2,4]-гексан	0.9192	0,9061

1. Белик А.В., Ульянова Л.В., Зефилов Н.С. Простая модель связи между молекулярной структурой и плотностью вещества // Докл. АН СССР.1990. Т.313, вып.3.С.628-629.
2. Рукавишников В.В., Белик А.В. Новый алгоритм пространственного представления и расчета объема органических соединений // Вестн. Челяб. ун-та. Сер. 4. Химия. 2004. №1. С. 44-45.

СИНТЕЗ ЦИКЛОГЕКСИЛЗАМЕЩЕННЫХ МОНО- И ПОЛИМЕТИЛБЕНЗОЛОВ

Кратирова Д.Д., Курганова Е.А., Балукова А.А.

Ярославский государственный технический университет

Циклогексилбензол (ЦГБ) и его метильные производные являются потенциальными источниками для получения нафтеновых кислот, бифенил- и 9-оксофлуоренкарбоновых кислот. В этой связи разработка экологически чистых, базирующихся на доступном нефтехимическом сырье методов получения ЦГБ и его метильных производных является актуальной задачей.